

Title	計算機シミュレーションによる非平衡統計力学(第55回物性若手夏の学校(2010年度),講義ノート)
Author(s)	伊藤, 伸泰
Citation	物性研究 (2011), 95(4-5): 456-462
Issue Date	2011-01-05
URL	http://hdl.handle.net/2433/169408
Right	
Type	Departmental Bulletin Paper
Textversion	publisher

計算機シミュレーションによる非平衡統計力学

伊藤伸泰*

東京大学大学院工学系研究科・物理工学専攻

概要

熱力学・熱平衡統計力学の出発点が「熱とは何か」という問題であるように、「熱がどのように伝わるか」という問題は非平衡状態の理論の出発点であった。この問題に対する最初の成功は、19世紀初頭のフーリエによる熱の理論である。以来、熱伝導を分子運動に結び付ける研究が営々続けられた。その努力が実り、今日では熱伝導・電気伝導や流体粘性といった線形非平衡現象を、分子運動から再構築することが可能となった。これは散逸揺動関係、線形応答、久保公式といった現象論的な理論と、計算機の発達とが相俟っての成果である。この成果を踏まえ、現在の統計力学では非線形非平衡現象の研究が本格化している。本サブゼミでは、線形非平衡現象に対する近年の研究について計算機シミュレーションを中心に紹介し、各論的に成果が挙げり始めている非線形非平衡状態の研究に進む。さらに非線形非平衡状態の物質を組み合わせることにより、複雑多様な機能をもったシステムに到達できると期待される。計算機や細胞がその例である。こうした自律的なシステム（個体）の集団が、分子の到達しうる巨視的な状態の1つの極点と考えられる。個体集団、たとえば生態系や経済市場といった系が自律的に多様性を維持し続けるのかというこのスケールでの現在の懸案についても議論する。

1 はじめに

物理学は要素還元型の学問として要素を探索する強力な方法論をもっている。と同時に、分解した要素から全体を再構成する方法論でも優れた伝統を持っている。これが統計物理学である。こうした分析的手法と統計物理学的手法とを使って19世紀に確立した現代の原子論は、物質が分子からなることを明らかにした。20世紀中には個々の原子・分子を操作する技術にも到達したことを受けて、今世紀に入って科学技術諸分野で諸現象の分子からの再検討が進められている。例えばナノ、バイオ、ITの三大柱すべて、分子スケールを出発点とする科学技術である。そして統計物理学の成果は、分子集団の性質を活用しようというこうした研究を支える、最も基本的な知見となっていると考えられる。

統計物理学では物質のふるまいを分子の性質や運動に帰着させることを目標に精力的な研究が進められてきた。その結果、熱平衡状態は十分に確立し、線形非平衡状態の現象論（線形非平衡熱力学・線形応答理論・久保公式）と合わせて、固体諸科学、物性諸科学が生み出された。また線形非平衡状態と分子運動との関係も解明され非線形非平衡状態の研究も進められており、このあたりが現在の到達点といえよう。

今日、いわゆるムーアの法則を超える演算速度の成長をし始めた計算機の助けにより、統計物理学のこうした歩みも急加速した。2011年より運用がはじまることが期待されている10PFLOPS級の計算機では、1モルの演算、すなわちアボガドロ数 $N_A = 6.02 \times 10^{23}$ 回の演算が実現可能となる。計算機自身はさらに成長を続けることが期待され、EFLOPSからZFLOPS級の計算機が普及した暁にはモルスケールの演算も日常的となろう。人間スケールの物質中の分子数を特徴づけるのがアボガドロ数であることを考えると、こうしたアボガドロ数回の演算を実現する計算機（アボガドロ級計算機）は分子レベルからの巨視的物質の設計のための道具としての活躍が期待される。

*電子メール：ito@ap.t.u-tokyo.ac.jp

シリコン結晶を単なる固体としてとらえるのに留まるのではなく、シリコン原子の集合体としてとらえ、個々の原子スケールレベルで不純物・酸化膜・導体を作りこむことにより集積回路を実現された。そして今日、同様の可能性のあらゆる物質での模索が推進されている。その果てには、例えば流れる川を見、風を感じたときに、それを単なる流体としてとらえるにとどまらず、莫大な数の水分子や空気分子の運動として自在に活用・制御することにより、新しい可能性が拓かれるかもしれない。こうした段階に向けて、分子運動と分子集団との関係の理解が不可欠である。

2 分子から巨視的な現象へ

分子運動から巨視的な現象を考える際に、複雑な分子模型を使う必要は必ずしもない。対象とする現象を再現する最も簡単な分子模型を使えば十分である。一口に分子といってもさまざまである。ナノメートル程度の大きさの単原子分子から、数十・数百ナノメートル以上の高分子・蛋白質などまである。分子間の相互作用も、球対称の s 波的なものから複雑な多体相互作用などまである。しかし最初に考えるべきは最も簡単な状況である。複雑な構造や相互作用を考える前に、考えたい現象を実現する最も簡単なものはなにかを考えるのである。

最も簡単な分子模型といっても、理想気体分子模型は不適当である。相互作用しない粒子模型では、熱平衡状態の実現すらできない。剛体球やレナード・ジョーンズ粒子のような球対称な 2 体相互作用をする粒子を分子模型として使えば、分子運動から基本的な巨視的な現象を再現することができる。

剛体球は熱平衡状態で固体相と流体相の 2 相を持ち、密度により両相間を相転移する。剛体相互作用のポテンシャル関数はゼロまたは無限大の値をとるとして記述されるので、エネルギーの尺度がないことに留意されたい。温度変化は時間尺度を変化させるだけである。剛体球系には気体相・液体相の区別がないが、レナード・ジョーンズ粒子は固体・気体・液体の物質の三態を備えている。レナード・ジョーンズ粒子の場合は、必要最小限の距離以内の相互作用のみを考える、いわゆる「ポテンシャルカットオフ付きのレナード・ジョーンズ粒子」を使えば十分である。物性物理学では剛体球はコロイド粒子、レナード・ジョーンズ粒子は希ガス分子の模型として使われることが多いが、以下では単に簡単な分子の理論模型とみなすことにしよう。現象の尺度が分かりやすくなるように、粒子の直径あるいは平均粒子間距離を 1 nm と考えて議論を進めることにする。

計算機シミュレーションに際しては、こうした 1 粒子当たり数百バイトの記憶領域を要する。座標・運動量や力の成分の他に、近くにある粒子の表やこの作表のための作業領域のためである。蛙跳差分法・ヴェルレ法などの正準差分方程式などを用いて運動軌道を近似計算してゆくと、計算のほとんどを力の計算が占める。固体流体の転移密度あたりでは、上記の簡単な粒子模型を使うと 3 次元で大体数百から数千演算ぐらいで 1 粒子に作用する力が計算できる。1 対の粒子間に作用する力の計算に 10 から 20 演算程度で、剛体球模型では 1 つ粒子は 10 程度の粒子と相互作用し、またレナード・ジョーンズ粒子は 50 から 100 粒子程度と相互作用しているからである。

計算機シミュレーションに際しては、さまざまな工夫が必要になる。例えば主記憶と CPU コアとの間でデータがスムーズに転送されるように、キャッシュ記憶の有効活用に着目することが挙げられる。また、粒子間相互作用が短距離なので、並列化も平易である。今日のトップエンドの計算機は多数の計算ノードを通信ネットワークでつないだ構造をもつが、こうした計算機の性能も比較的容易に引き出すことができる。

以上のように分子模型 1 つ・時間ステップ 1 あたり、おおざっぱにまとめると 500 バイト・2000 演算を要する。もちろんこれは模型やパラメータ、作譜の工夫により 2、3 倍あるいは $1/2$ 、 $1/3$ 程度の幅を持つ数字であるが、ほどほどに工夫したプログラムで比較的容易に実現した実績に基づく数字でもあり、信頼できる目安となる。1 粒子のデータは近隣の粒子についての計算でも使われるので、近くの粒子の座標データがメモリー上でも近くのアドレスに配置されているとキャッシュが有効に活用されて実行速度の向上が見込まれる。

今日の計算機の CPU コアは 10 から 20 GFLOPS の演算性能を持つので、コアあたり 5 百万から 1 千万粒子程度を更新できることになる。1 TFLOPS のクラスター計算機であれば 5 億粒子程度を、来年にも運用が始まると期待されている 10 PFLOPS 級の計算機では 5 兆粒子程度を更新できることになる。

以上を踏まえ、低密度・高密度過ぎない日常的な物質の示す現象を念頭に、分子から複雑な巨視系・巨視現象にいたる道程を表 2 にまとめる。この各階層を以下の節で説明する。

分子数	大きさ	現象論や例	必要な計算性能
数個 $\sim 10^3$	数 nm	熱平衡状態、素材	MB・MFLOPS
$\sim 100^3$	100 nm	線形非熱平衡状態、受動デバイス、層流	GB・GFLOPS
$\sim 1,000^3$	1 μ m	非線形非平衡状態、能動デバイス、乱流	TB・TFLOPS
$\sim 10,000^3$	10 μ m	複雑なシステム、細胞・プラント	PB・PFLOPS

表 1: 分子運動から複雑な物質・システムまでの階層

3 熱平衡状態

系の中に1分子がない、あるいは分子間衝突の間隔が無視できるほど密度の低い系の場合には、分子と境界との相互作用や外場の形状により系のふるまいが決まる。こうした状況は、例えばプラズマ物理学で重要となるが、通常の物質では分子間衝突が最も短時間の力学事象である。常温常圧の典型的な状態では分子の速さが数百 m/s、分子間距離が数 nm 程度なので、分子間衝突は $1 \text{ [nm]} / 100 \text{ [m/s]} = 10 \text{ ps}$ ぐらいとなる。気体では分子間距離がもう一桁ぐらい大きい。こうした分子間衝突の時間よりも長い時間での系のふるまいを考えることが第一歩となる。といってもナノ秒程度以上でというまだ十分に短い時間でではあるが。

分子は恣意的な初期条件から運動をはじめても、衝突に伴う軌道の変更が大きいため数回の衝突の後に定常分布に至るとみなしてよいことが知られている。この定常状態は熱平衡状態に相当する。熱力学は通常、無限個の分子が入った無限に大きい極限（熱力学的極限）を扱うが、有限の大きさ・有限個の分子の場合にはもちろん平均的なふるまいからのずれ、すなわちゆらぎを伴う。定常分布はゆらぎも含めて正しく記述する。これを最も簡単でまたそれだけに基本的な系を例として、以下で具体的に説明しよう。

正方形の容器の内部に N 個の剛体円盤粒子を閉じ込めた系を考える。粒子間はもちろん、容器の壁とも完全弾性衝突をするとする。また粒子の回転自由度は考えないものとする。容器の辺に沿って x 軸、 y 軸を取り、粒子 i ($i = 1, 2, 3, \dots, N$) の座標を $\vec{r}_i = (x_i, y_i)$ 、速度を $\vec{v}_i = (v_{x,i}, v_{y,i})$ とする。

$N = 1$ 、すなわち1粒子の場合には粒子間の衝突はなく、粒子は容器の壁と衝突を繰り返す。この時、速度分布はいつまでも初期条件に依存し続け、普遍的な特徴はみられない。しかし位置はどんな初期条件からでも、確率1で系内に一様に分布するようになる。初期速度の成分 $v_{x,i}, v_{y,i}$ の比が有理数の場合には周期運動になり一様分布しないのであるが、有理数比になる確率は零だからである。

2粒子以上 ($N \geq 2$) の場合には、等重率の原理に従って初期条件によらない位置分布、速度分布になる。位置分布は系内に一様である。すなわち2粒子以上の場合、系は衝突時間について粗視化するとミクロカノニカルアンサンブル（小正準アンサンブル）に従い、熱平衡状態が実現することになる。粒子数をあまり大きくすると粒子は流体から固体に相転移してしまうが、ここでは N は粒子が流体相に留まる程度にとどめて考えている。

速度分布は速度空間中の等エネルギー集合に一様になる。等エネルギー集合は

$$\frac{m}{2} \sum_{i=1}^N \vec{v}^2 = \frac{m}{2} (v_{x,1}^2 + v_{y,1}^2 + v_{x,2}^2 + v_{y,2}^2 + \dots + v_{x,N}^2 + v_{y,N}^2) = E \quad (1)$$

を満たす点の集合なので、 $2N$ 次元中の半径 $\sqrt{2E/m}$ の球面となる。この分布を、1つの粒子の速さ $v = |\vec{v}|$ を指定したときの分布、すなわち1粒子の速さの分布関数に書き換えると、

$$P_N(v) = \begin{cases} C_N \cdot v \left(1 - \frac{mv^2}{2E}\right)^{N-2} & (v \leq \sqrt{2E/m} \text{ の場合}) \\ 0 & (v > \sqrt{2E/m} \text{ の場合}) \end{cases} \quad (2)$$

となる。ここで C_N は規格化定数である。

以上、簡単のため2次元の場合を考えたが、2次元以上でも同様である。 d 次元 ($d \geq 2$) の場合は、

$$P_{N,d}(v) = \begin{cases} C_{N,d} \cdot v^{d-1} \left(1 - \frac{mv^2}{2E}\right)^{[d(N-1)-2]/2} & (v \leq \sqrt{2E/m} \text{ の場合}) \\ 0 & (v > \sqrt{2E/m} \text{ の場合}) \end{cases} \quad (3)$$

となる。この分布関数が少数自由度系の熱統計力学の出発点となる。この分布関数はいわゆるレニ・ツァリス分布と呼ばれるものである。ここで E/N および粒子密度を一定に保って N を無限大とする熱力学的極限をとれば、これらの速度分布関数はマクスウェル分布になり、ボルツマン分布が実現する。

N を無限大にしくとも、5 から 10 ぐらいでこの分布関数の形はほとんどマクスウェル分布に見えるので、5 から 10 個程度からなる部分は局所熱平衡状態を実現すると期待してよい。とはいえ 2 次転移点（臨界点）近くでは相関長が伸び、熱平衡構造がもっと大きなスケールに影響を与えるようになる。また 1 次転移点近くのヒステリシス内では、相境界でのロスと単相でのゲインとのバランスによって決まる大きさが本質的となる。

剛体円盤（級）粒子以外の系では、分布関数の解析的な扱いは困難であるが、やはり同様のふるまいをする。剛体ポテンシャルの場合よりも相互作用の到達範囲が広いと、局所熱平衡状態を実現する大きさも剛体の場合よりも大きくなるが、短距離相互作用の場合にはいずれにせよ 10^3 程度も用意すれば N 無限大の熱力学でほとんど記述されるのである。

こうしたことから簡単な分子模型を用いた場合に 10^3 程度が局所熱平衡状態の大きさとなることが結論される。これが表 2 の最初の行の意味である。

4 線形非平衡状態

温度差・化学ポテンシャル差・ずり運動などの外力により非平衡状態に維持すると、物質やエネルギーなどの流れを伴う状態になる。計算機シミュレーションによれば、外力が相当に大きくとも物質が相分離したり相界面が生じたりしない限り、流れが外力に比例する線形応答が成り立つ（反応系ではこの限りではないことを後に見る）[1, 2, 3, 19, 5]。例えば数百個程度の厚さの超臨界流体のレナードジョーンズ粒子系に、臨界温度程度の温度差を与えても線形に応答したフーリエ熱伝導をすることが確認できる。あるいは同じく数百個程度の厚さの剛体球系に、熱速度程度のずり速度を与えても線形に応答したニュートン流体としての流れが実現することも確認できる。こうした線形非平衡状態は、熱力学量が向きに依存する分布関数をもつ。例えば熱を伝えている分子集団では、温度がベクトル量となるのである。線形応答仮説で仮定しているように、この向きの依存性による分布関数の熱平衡状態からのずれは熱平衡状態からの外力に比例している [6]。

線形非平衡状態での輸送が分子運動とどのように結びついているのかは、現代原子論の黎明よりの課題であった。分子が従う可逆な力学から分子集団が従う非可逆なふるまいがどのようにして生じるのか、外力に対して線形に応答するのはなぜかという疑問である。線形輸送係数はエントロピー生成の速さ、すなわち非可逆性の指標である。可逆運動の線形輸送係数は 0 であり、巨視的な物質は 0 でない一定の線形輸送係数を持ち非可逆にふるまう。分子から巨視系に至るどこかで 0 の係数から 0 でない係数へと移行しているのである。久保公式に代表されるような線形応答理論 [7, 8] より、線形非平衡状態での輸送係数は対応する物理量の相関関数である。素朴には相関関数は指数減衰するであろうから、そのスケールに対応する時間・空間より小さい方が可逆力学（ $z=1$ の相対論的時空）の世界で、大きい方が非可逆力学（ $z=2$ の拡散型時空）と期待されるかもしれない。

しかし保存量の輸送係数の場合はこの移行には典型的なスケールが存在しない。熱伝導の場合にはエネルギーが、電流であれば電荷、流体運動では運動量が流れる。こうした保存量は拡散して薄まってゆくことこそあっても、生成消滅はしない。すなわち相関関数が緩和する主要因は拡散という遅い過程である。時間 t の間に $t=0$ での保存量は、初期位置から \sqrt{t} 程度の範囲に薄まる。系が d 次元の場合この領域の体積は $t^{d/2}$ 程度なので、相関関数 $C(t)$ の緩和は長時間極限で $C(t) \sim t^{-d/2}$ というべき緩和となる。「長い尻尾 (long tail)」と呼ばれる緩和である [9, 10]。2 次元以下、すなわち $d < 2$ では熱ゆらぎの効果による異常により拡散が動的指数 $z=2$ からずれて $z=1+d/2$ となる [11]。これに伴い、相関関数の長時間ふるまいは $C(t) \sim t^{-2d/(2+d)}$ となる。

無限ではなく有限（大きさ L ）の系の輸送係数 $\lambda(L)$ を、試みに相関関数の積分を大きさに比例する時刻で打ち切ったものとして評価してみよう。すると、

$$\lambda(L) \sim \begin{cases} \lambda_0 + aL^{1-d/2} & (2 \text{ 次元以上の場合}) \\ L^{(2-d)/(2+d)} & (2 \text{ 次元以下の場合}) \end{cases} \quad (4)$$

というふるまいが期待される。べきが0となる2次元の場合は、大きさ L に伴う対数発散を意味するものと解釈する。計算機シミュレーションにより熱伝導率の系の大きさ L への依存性を調べると、2次元では $\log L$ 程度の対数発散が、また3次元では $1/L^{1/2}$ に矛盾しない依存性に従って一定値に収束することが確認できる [2]。

保存量の緩和という制約から輸送係数にはこのような大きさ依存性を持つ。3次元の物質では物性値としての輸送係数が自然に決まるが、分子運動と巨視系との間は代数的な依存性でつながっている。いわゆる「クロスオーバー」しているのである。線形非平衡輸送は局所熱平衡状態に対する摂動であることから、局所熱平衡状態の大きさよりももう一桁上の大きさでの現象であろう。前節でみたように局所平衡が 10^3 程度の大きさでの性質であるので、線形非平衡状態は 100^3 程度の大きさでの性質と考えられるわけである。実際、計算機シミュレーションからマイクロとマクロとがクロスオーバーする大きさは、3次元の流体相では分子間距離の数百倍であることが確認される。

現実の物質の場合には、不純物や欠陥あるいは他の外部条件によって決まる時間で相関関数が減衰し、系の大きさによって決まる時間までは相関関数の長い尻尾が続かないこともある。この打ち切り時間が相関関数の積分の上限となり、またこの時間がマイクロとマクロとの境となる。例えば結晶中でのフォノンの不純物散乱や電気伝導体中の不純物などによってである。こうした効果により、マイクロな時間尺度での相関時間のふるまいを長い尻尾の形で外挿して予想した輸送係数よりも小さい値となることがある。また1次元的あるいは2次元的な物質でも、輸送係数が巨視的な極限で収束していることもあるであろう。

マイクロからマクロに至る途中で変化の遅い集団運動が現われ、その結果、相関関数が単調に減衰しなくなることもある。その場合、輸送係数はマイクロな運動からの外挿値よりも大きな値となることもある。例えば3次元ニュートン流体の粘性率は、乱流状態では尺度を大きくすると流体の乱流運動を生み出している渦自身が粘性率に寄与する渦粘性のため、巨視極限では発散してゆく。

このようにマイクロとマクロとの関係は、熱平衡状態から1歩踏み出した線形非平衡状態ですでに一筋縄では行かない、逆に言うと豊かさを持った状態なのである。

5 非線形非平衡状態、個体そしてシステムへ

物質の非線形非平衡状態へと進もう。非線形なふるまいの出自は、マイクロには相転移 [12] や反応 [13, 14, 15, 16, 17] より、マクロには集団運動の非線形挙動よりも多様である。あまたある非線形非平衡現象の中から、本講義では統計物理学の立場から特に重要で最も挑戦的と考えられる以下の3つの課題を議論する。1つはエネルギー工学から環境科学まで地球スケールの科学では中核的な役割を果たすことが多い気液相転移の動力学である [18, 19, 20, 21, 22]。もう1つは破壊現象 [23] で、その面白さ・重要性は自明であろう。そしてもう1つは生物系である。生物系ではまず、正準運動方程式で記述される分子に反応の自由度を導入することにより生命が宿る可能性が開けることを論じた。その後、生物生態系のように「多様性」を維持し続ける進化の動力学の解明を試み、合わせて生物生態系に留まらず単なる混沌ではない多様性を生み出し維持し続ける機構を捉え活用するために、「多様系」なる問題を提唱する [24, 25, 26, 27, 28, 29, 30]。

6 展望

分子運動から出発し $10,000^3$ すなわち1兆粒子系程度で強非線形強非平衡システム、たとえば生きている細胞に到達することがPFLOPS級の計算機と共に現実的となってきた。これは分子運動の統計力学の終着点を見据えた最終段階と考えられる。さらに表2の先に「多様系」を付け加えることにより、この終着点を活用して生態系や経済系はじめ多様なものが共存し続けるこの世界まで到達することが期待される。

付録: 事象・模型・認識

統計物理学の研究対象は今日、これまで物理学的な系と考えられていたものにこだわらない。例えば経済現象や人間関係なども対象としている。このため現代科学の出発点であるペーコンの立場を超え、反復実験可能性に疑いがある

る対象を扱うようになっている。ペーコン主義自体は、例えば宇宙論では既に変質しているのでそれほど気にする必要はないともいえる。しかし人文学的な現象を対象とし始めたことに伴い、「客観的事象」への疑いは残る。そこで人間の認識に加えて事象の個別化・相対化を図った場合の科学的研究について議論しておきたい。議論の結果は現状の追認である。ではあるが、唯一主体間で共有しうるものとしての「模型」の位置づけと「よい模型」＝「簡単な模型」という立場が特に有効となる点に留意されたい。これは主体の多様化と理論研究において計算機シミュレーションという手段が不可欠となっている現状とも整合的なため、有効な立場と考えられる。

一般に森羅万象から特定の事物を捉えるためには、その事物を認識し記述し客観化する必要がある。「これはこういうものである」、「これをこういうものとしてあつかう」という事象の模型が個々の事象をカオス的事象から個別的事象への原点である。外部から主体に映る「事象」を主体の「認識する事実」にするためには、主体間で共有しうる「模型」が重要である。いうまでもなく認識と事実とは主体間では共有されない。このためもし模型までもが共有されない場合、その主体の認識は他の主体にとっては事象にとどまるからである。このため模型の記述は、その模型を使う認識主体の集団で了解できるものである必要がある。かつては認識の主体は主に人間であったが、現代社会では計算機はじめとする多様な主体が機能している。これに伴い模型のこうした主体との共有にも留意したものが便利である。また模型自身は事象認識のための作業仮説であるから、簡単なものがよい。より簡単な模型が、より良い模型である。ある認識に到達するために不必要な性質を備えた模型は、悪い模型である。

参考文献

- [1] T. Shimada, T. Murakami, S. Yukawa, K. Saito and N. Ito, J. Phys. Soc. Jpn. **69** (2000) p.3150, "Simulation Study on Dimensionality Dependence of Heat Conduction".
- [2] T. Murakami, T. Shimada, S. Yukawa and N. Ito, J. Phys. Soc. Jpn. **72** (2003) p.1049, "Energy Transport in Multiphase System".
- [3] T. Ishiwata, T. Murakami, S. Yukawa and N. Ito, Intern. J. Modern. Phys. C **15** (2004) p.1413, "Particle Dynamics Simulation of Navier-Stokes Flow with Hard Disks".
- [4] F. Ogushi, S. Yukawa and N. Ito, J. Phys. Soc. Jpn. **74** (2005) p.827, "Heat Conduction Phenomena of Lennard-Jones Particle System in Supercritical Fluid Phase".
- [5] T. Yuge, A. Shimizu and N. Ito, J. Phys. Soc. Jpn. **74** (2005) p.1895, "Nonequilibrium Molecular Dynamics Simulation of Electric Conduction".
- [6] S. Yukawa, T. Shimada, F. Ogushi and N. Ito, J. Phys. Soc. Jpn. **78** (2009) 023002, "Nonequilibrium Microscopic Distribution of Thermal Current in Particle Systems".
- [7] R. Kubo, J. Phys. Soc. Jpn. **12** (1957) p.570, "Statistical-Mechanical Theory of Irreversible Processes. I. General Theory and Simple Applications to Magnetic and Conduction Problems".
- [8] R. Kubo, M. Yokota and S. Nakajima, J. Phys. Soc. Jpn. **12** (1957) p.1203, "Statistical-Mechanical Theory of Irreversible Processes. II. Response to Thermal Disturbance".
- [9] B. J. Alder and T. E. Wainwright, Phys. Rev. **A1** (1970) p.18, "Decay of the Velocity Autocorrelation Function".
- [10] W. Pomeau and P. Résibois, Phys. Rep. **19** (1970) p.64, "Time Dependent Correlation Functions and Mode-Mode Coupling Theories".
- [11] O. Narayan and S. Ramswamy, Phys. Rev. Lett. **89** (2002) 200601, "Anomalous Heat Conduction in One-Dimensional Momentum-Conserving Systems".
- [12] Y. Ozeki and N. Ito, J. Phys. A **40** (2007) R149, "Nonequilibrium relaxation method".

- [13] A. Kamimura, S. Yukawa and N. Ito, J. Phys. Soc. Jpn. **74** No.3 (2005) p.1071, "Rate constant of Kaneko-Yomo model".
- [14] A. Kamimura, S. Yukawa and N. Ito, J. Phys. Soc. Jpn. **75** No.2 (2006) 024005, "Rate constant in Far-from-equilibrium states of a Replicating system with Mutually Catalyzing Chemicals".
- [15] A. Kamimura and N. Ito, J. Phys. Soc. Jpn. **77** No.12 (2008) 125001, "Nonequilibrium Molecular Dynamics Simulations on Thermal Diffusion in Binary Mixtures of Hard Spheres".
- [16] A. Kamimura, T. Shimada and N. Ito, Artificial Life and Robotics, **13** (2009) 474, "Nonequilibrium dynamics of a reacting network system."
- [17] A. Kamimura, H. J. Herrmann and N. Ito, Physical Review **E80** (2009) 061132, "Distribution in flowing reaction-diffusion systems".
- [18] H. Okumura and N. Ito, Phys. Rev. E **67** (2003) 045301(R), "Nonequilibrium molecular dynamics simulations of a bubble".
- [19] F. Ogushi, S. Yukawa and N. Ito, J. Phys. Soc. Jpn. **74** No.3 (2005) p.827, "Heat Conduction Phenomena of Lennard-Jones Particle System in Supercritical Fluid Phase".
- [20] F. Ogushi, S. Yukawa and N. Ito, J. Phys. Soc. Jpn. **75** No.7 (2006) 073001, "Asymmetric Structure of Gas-Liquid Interface".
- [21] H. Inaoka, S. Yukawa and N. Ito, Physica **A389** (2010) 2500, "Spray flow-network flow transition of binary Lennard-Jones particle system".
- [22] T. S. Komatsu and N. Ito, Physical Review **E81** (2010) 010103(R), "A thermal diode utilizing asymmetric contacts to heat baths".
- [23] N. Yoshioka, Ferenc Kun, and Nobuyasu Ito, Phys. Rev. Lett. **101** (2008) 145502, "Size scaling and bursting activity in thermally activated breakdown of fiber bundles".
- [24] T. Shimada, S. Yukawa and N. Ito, in proc. of Sixth Int. Symp. on Artificial Life and Robotics (AROB 6th 2001), ed. M. Sugisaka and H. Tanaka (Gotanda, Tokyo, Japan 2001) ISBN4-9900462-1-8 (2001) p.353, "Self Organization in Ecosystem".
- [25] T. Shimada, Satoshi Yukawa and N. Ito, Artif. Life Robotics **6** (2002) p.78, "Self-organization in an ecosystem".
- [26] T. Shimada, Y. Murase, N. Ito and K. Aihara, Artificial Life and Robotics, **11** (2007) 153, "A simple model of evolving ecosystems".
- [27] Yohsuke Murase, Takashi Shimada and Nobuyasu Ito, Artificial Life and Robotics, **13** (2009) 460-463, "Phase diagram and stability of ecosystems. "
- [28] Yohsuke Murase, Takashi Shimada and Nobuyasu Ito, to appear in New Journal of Physics (2010), "A simple model for skewed species-lifetime distributions".
- [29] Yohsuke Murase, Takashi Shimada, Nobuyasu Ito and Per Arne Rikvold, Journal of Theoretical Biology **264** (2010) p.663, "Random walk in genome space: A key ingredient of intermittent dynamics of community assembly on evolutionary time scales".
- [30] Yohsuke Murase, Takashi Shimada, Nobuyasu Ito and Per Arne Rikvold, Physical Review **E81** (2010) 041908, "Effects of demographic stochasticity on biological community assembly on evolutionary time scales".